

基于 Müller-Brown 势的神经网络建模

杨远青 22300190015

CompPhys 24

2025 年 3 月 29 日

1 问题描述

1.1 函数定义

Müller-Brown 势能函数解析式为：

$$U(x_1, x_2) = s \cdot \sum_{k=1}^4 A_k \exp [\alpha_k (x_1 - a_k)^2 + \beta_k (x_1 - a_k)(x_2 - b_k) + \gamma_k (x_2 - b_k)^2]$$

1.2 参数系统

振幅系数: $\mathbf{A} = (-200, -100, -170, 15)$

二次项参数: $\boldsymbol{\alpha} = (-1, -1, -6.5, 0.7)$

$\boldsymbol{\beta} = (0, 0, 11, 0.6)$

$\boldsymbol{\gamma} = (-10, -10, -6.5, 0.7)$

中心坐标: $\mathbf{a} = (1, 0, -0.5, -1)$

$\mathbf{b} = (0, 0.5, 1.5, 1)$

缩放因子: $s = 0.05$

定义域: $x_1 \in (-1.5, 1), x_2 \in (-0.5, 2)$

势能截断: $U \leq U_{\text{cut}} = 9$

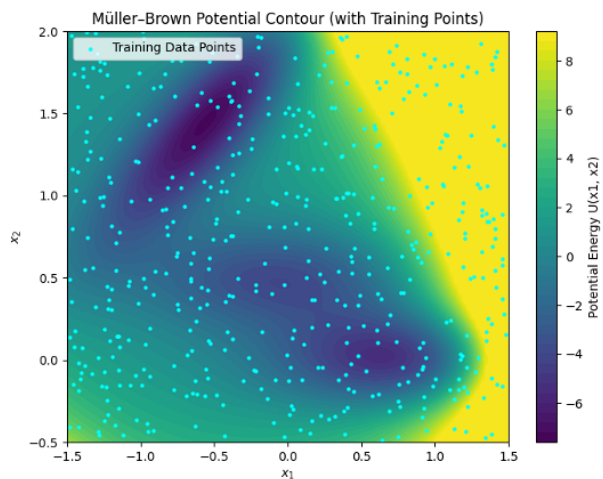


图 1: 势能面与训练集可视化